

11-1 動く水素が鉄の割れを促進する

—第一原理計算が示すモバイル水素による鉄の脆化効果—

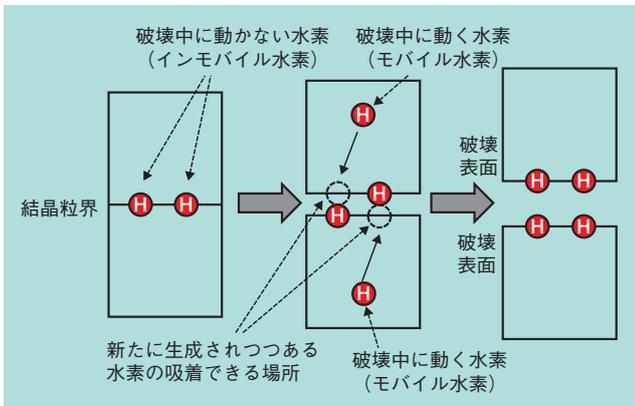


図 11-2 モバイル水素効果の概念図

破壊前に結晶粒界にあった水素（インモバイル水素）のほかに、破壊表面の形成中に動きまわることによって、新たに生成しつつある破壊表面上に取り付き、その生成を助ける効果を持つ水素をモバイル水素と呼びます。

水素が原因で生じる鉄鋼材料の脆化については 100 年近く研究の歴史がありますが、その脆化の現れ方は極めて複雑で様々なバリエーションがあり、脆化メカニズムはひとつではないと考えられています。そのため、その全体像は未だよく分かっておらず、「群盲象をなでる」状態にあると言われています。

本研究では、主に高強度鋼においてその中に侵入した水素によって結晶粒界に沿った割れが生じる現象（粒界水素脆性）に着目し研究を行っています。通常の金属材料はひとつの結晶ではなく、数 10 μm 以上の大きさの結晶の粒の集合体として構成されており、結晶粒の間の境界に結晶粒界と呼ばれる不整合な構造を持っています。そこに水素が集まることによって、結晶粒界に沿った割れが生じますが、この現象ひとつとっても詳しいメカニズムはよく分かっていません。

本研究では、第一原理計算という量子力学に基づいた電子状態計算法を用いて、鉄の結晶粒界に水素が集まることでその結晶粒界が割れやすくなること、そしてさらに、き裂が進んでいる最中に水素が動きまわることによって破壊表面の形成を助け、結晶粒界を割れやすくするという複合効果が働いていることを定量的に明らかに

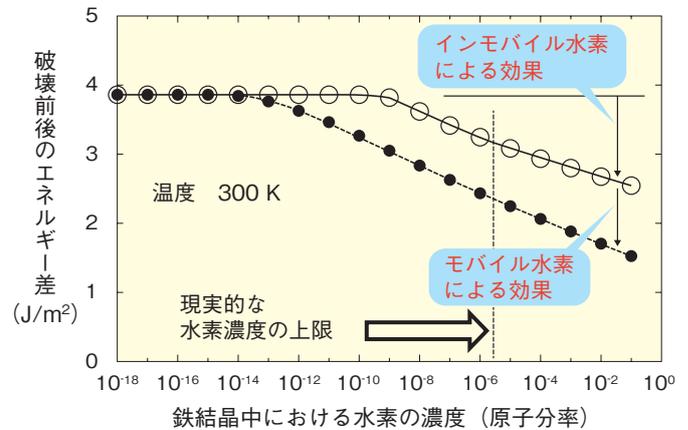


図 11-3 破壊前後のエネルギー差の計算結果

結晶粒界の割れやすさを示す破壊前後のエネルギー差を第一原理から計算した結果を示します。鉄結晶中の水素の濃度によって、そのエネルギー差がどの程度低下するかを示した図です。特に、鉄鋼中の現実的な水素濃度（ $\sim 10^{-6}$ ）の範囲では、脆化効果はモバイル水素による効果が支配的となることが示されています。

しました。そのような働きをする水素はモバイル水素（mobile hydrogen）と呼ばれています。

図 11-2 は、モバイル水素が結晶粒界を割れやすくする効果を示した概念図です。結晶粒界が割れやすくなるのは、割れる前の粒界のエネルギーと割れた後の破壊表面のエネルギー差が水素の存在によって小さくなるのが原因と考えられます。結晶粒界を割れやすくする元素は他にもありますが、室温ぐらいの温度では動くことはできません。しかしながら、体心立方晶の鉄の中の水素だけは、室温においても速い拡散速度を持ち得るのです。例えば、数 mm の厚さの鉄試料の中に水素を注入しても、数分でほとんど外へ抜けてしまうほどです。そのような水素は、結晶粒界における鉄原子間の結合が切れようとしているところに近づくとその切断を助ける働きがあると考えられます。その効果を第一原理計算及び熱力学的解析によって詳しく計算した結果、図 11-3 のように、割れる前に結晶粒界にあった水素だけでは、脆化効果が小さいはずの現実的な水素濃度領域（ $\sim 10^{-6}$ 原子分率）においても、モバイル水素によって粒界の割れやすさが大いに促進されることが分かりました。

●参考文献

Yamaguchi, M. et al., Mobile Effect of Hydrogen on Intergranular Decohesion of Iron: First-Principles Calculations, Philosophical Magazine, vol.92, no.11, 2012, p.1349-1368. (with Corrigendum, vol.92, no.24, 2012, p.3121-3124).